



TITLE:

森公式による揺らぎの基礎解析(第5回『非平衡系の統計物理』シンポジウム,研究会報告)

AUTHOR(S):

沢田, 功

CITATION:

沢田, 功. 森公式による揺らぎの基礎解析(第5回『非平衡系の統計物理』シンポジウム,研究会報告). 物性研究 1999, 71(5): 749-753

ISSUE DATE:

1999-02-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/96572>

RIGHT:

森公式による揺らぎの基礎解析

大阪大学大学院基礎工学研究科

物性物理科学分野 三宅研 沢田 功

[1] 森公式における揺らぎと記憶関数

森公式とは、量子力学の礎である Heisenberg 方程式を統計力学の礎である generalized Langevin 方程式 (GLE) に変形する、射影演算子 P による変換公式であるが、変換後の GLE を森公式と呼んでいる。演算子 $A(t) = e^{iHt/\hbar} A e^{-iHt/\hbar}$ に対する森公式は次の通りである。

$$\frac{d}{dt} A(t) = \frac{i}{\hbar} [H, A(t)]_- \equiv iL A(t) = - \int_0^t \varphi_A(t-s) A(s) ds + f_A(t) \quad (1)$$

但し、 $(B(t), C) \equiv \beta^{-1} \int_0^\beta \text{Tr} [\rho B(t - i\hbar\lambda) C] d\lambda$, $\rho \equiv e^{-\beta H} / \text{Tr}[e^{-\beta H}]$ である。系に内在した揺らぎ $f_A(t) \equiv e^{(1-P) iLt} f_A$, $f_A = \dot{A} \equiv iL A$ が Heisenberg 方程式とは異なる時間発展をするため、 $f_A(t)$ の記憶関数 $\varphi_A(t) = (f_A(t), f_A^\dagger) / (A, A^\dagger)$ については森による連分数解が知られていた。 $\langle f_A(t) \rangle = 0$ を満たす揺らぎの内積で表現できている記憶関数は、一般化された揺動散逸定理を記述している。

しかしながら、遅延応答関数 $\chi_{AA}(\omega^+)$ を用いた、 $\varphi_A(t) = (2\pi)^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega^+ t} \varphi_A(-i\omega^+)$ の closed-form 解 (CFS) が、次のように求められる。

$$\varphi_A(-i\omega^+) = \frac{-\psi_A(-i\omega^+)}{1 - \frac{\psi_A(-i\omega^+)}{i\omega^+}}, \quad (2)$$

$$\psi_A(-i\omega^+) = -[W]^{-1} \frac{\chi_{AA}(\omega^+) - \chi_{AA}(0^+)}{-i\omega^+}. \quad (3)$$

但し、 $\omega^+ \equiv \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} (\omega + i\epsilon)$, $[W] \equiv \beta(A, A^\dagger) / V = -\chi'_{AA}(0^+)$, V は系の体積である。遅延応答関数 $\chi_{AA}(\omega^+) \equiv \chi'_{AA}(\omega^+) + i\chi''_{AA}(\omega^+)$ は、松原振動数を $\omega_n = 2n\pi T$ とする温度グリーン関数 $\chi_A(i\omega_n) = V^{-1} \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n \tau} (-) \langle T_\tau A^\dagger(\tau) A(0) \rangle$ を解析接続して得られる。

[2] 2-バンド電子系における粒子数および電流演算子の揺らぎ

(1) 中の揺らぎ $f_A(t)$ の解析を進めるために、(2) の記憶関数を計算する。(3) に注意すると、注目する演算子 A が保存量である場合、自明な解しか現れない。そこで、近似計算をさけるためにも、相互作用のない2-バンド電子系における成分別の粒子数演算子および電流演算子の運動を追う。その模型（銅と酸素が作る二次元電子系）は

$$H = \epsilon_d \sum_{i\sigma} d_{i\sigma}^\dagger d_{i\sigma} + \epsilon_p \sum_{\mathbf{k}\sigma} p_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger p_{\mathbf{k}\sigma} + N_L^{-1/2} \sum_{i\mathbf{k}\sigma} \left(e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i} t(\mathbf{k}) p_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger d_{i\sigma} + h.c. \right) \quad (4)$$

で表わされ、 $p_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger$ 及び $d_{i\sigma}^\dagger = N_L^{-1/2} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i} d_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger$ は O $2p_\sigma$ 結合軌道、Cu $3d_{x^2-y^2}$ のワニエ軌道におけるホールの生成演算子である。Cu の位置ベクトルを \mathbf{R}_i 、全単位胞数を N_L 、O 及び Cu の化学ポテンシャルから測定したエネルギーレベルを ϵ_p 、 ϵ_d としている。バンドギャップは $\Delta \equiv \epsilon_p - \epsilon_d$ とかけ、格子間隔 a 、最隣接軌道間遷移積分 t_{dp} を用いて、 $t(\mathbf{k}) \equiv [W(\mathbf{k})]^{1/2}$ (表式は後に示す。) となる。成分別の粒子数演算子および電流演算子は正電荷を e として

$$N_d = \sum_{\mathbf{k}\sigma} d_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger d_{\mathbf{k}\sigma}, \quad (5)$$

$$N_p = \sum_{\mathbf{k}\sigma} p_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger p_{\mathbf{k}\sigma}, \quad (6)$$

$$J = \frac{e}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \left(\nabla_{\mathbf{k}} t(\mathbf{k}) p_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger d_{\mathbf{k}\sigma} + h.c. \right) \quad (7)$$

と書け、対応する非保存部分は

$$\dot{N}_d = -\frac{1}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}\sigma} t(\mathbf{k}) \left(i p_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger d_{\mathbf{k}\sigma} + h.c. \right), \quad (8)$$

$$\dot{N}_p = \frac{1}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}\sigma} t(\mathbf{k}) \left(i p_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger d_{\mathbf{k}\sigma} + h.c. \right), \quad (9)$$

$$\dot{J} = \frac{\Delta e}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \nabla_{\mathbf{k}} t(\mathbf{k}) \left(i p_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger d_{\mathbf{k}\sigma} + h.c. \right) \quad (10)$$

となる。(4) は簡単に対角化でき、

$$H = \sum_{\mathbf{k}\sigma\gamma=\pm} E_\gamma(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}\sigma\gamma}^\dagger a_{\mathbf{k}\sigma\gamma}, \quad (11)$$

エネルギー分散 $E_\gamma(\mathbf{k}) \equiv (1/2)[\epsilon_p + \epsilon_d + \gamma\sqrt{\Delta^2 + 4W(\mathbf{k})}]$ 、 $\Delta_\gamma(\mathbf{k}) = [(E_\gamma(\mathbf{k}) - \epsilon_d)^2 + W(\mathbf{k})]^{1/2}$ 、 $a_{\mathbf{k}\sigma\gamma}^\dagger = [(E_\gamma(\mathbf{k}) - \epsilon_d)/\Delta_\gamma(\mathbf{k})]p_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger + [t(\mathbf{k})/\Delta_\gamma(\mathbf{k})]d_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger$ である。(5)-(7) のバンド内成分は (11) と交換するため、(8)-(10) は $\mu = d, p$ として、バンド間成分で記述できる。

$$\dot{N}_\mu = \dot{N}_\mu^{\text{inter}} = \frac{1}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}\sigma} B_\mu(\mathbf{k}) [E_+(\mathbf{k}) - E_-(\mathbf{k})] (i a_{\mathbf{k}\sigma+}^\dagger a_{\mathbf{k}\sigma-} + h.c.), \quad (12)$$

$$\dot{J} = \dot{J}_{\text{inter}} = \frac{e}{\hbar^2} \sum_{\mathbf{k}\sigma} F(\mathbf{k}) [E_+(\mathbf{k}) - E_-(\mathbf{k})] (i a_{\mathbf{k}\sigma+}^\dagger a_{\mathbf{k}\sigma-} + h.c.). \quad (13)$$

但し、 $B_d(\mathbf{k}) = [W(\mathbf{k})/\Delta_+(\mathbf{k})\Delta_-(\mathbf{k})]$ 、 $B_p(\mathbf{k}) = [(E_+(\mathbf{k}) - \epsilon_d)(E_-(\mathbf{k}) - \epsilon_d)]/[\Delta_+(\mathbf{k})\Delta_-(\mathbf{k})]$ 、 $F(\mathbf{k}) = (1/2) \sum_{\eta=\pm} [\Delta_\eta(\mathbf{k})/\Delta_{-\eta}(\mathbf{k})] \nabla_{\mathbf{k}} E_\eta(\mathbf{k})$ である。

対応する温度グリーン関数は $G_\gamma(\mathbf{k}, i\epsilon_n) = [i\epsilon_n - E_\gamma(\mathbf{k})]^{-1}$ として、次のように書け、

$$\chi_{\dot{N}_\mu}(i\omega_n) = N_L^{-1} \sum_{\mathbf{k}\sigma\gamma=\pm} \frac{W(\mathbf{k})}{\hbar^2} T \sum_{i\epsilon_n} G_\gamma(\mathbf{k}, i\epsilon_n) G_{-\gamma}(\mathbf{k}, i\omega_n + i\epsilon_n), \quad (14)$$

$$\chi_J(i\omega_n) = N_L^{-1} \sum_{\mathbf{k}\sigma\gamma=\pm} \left[\frac{e}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} t(\mathbf{k}) \right]^2 \left[\frac{\Delta}{\hbar} \right]^2 T \sum_{i\epsilon_n} G_\gamma(\mathbf{k}, i\epsilon_n) G_{-\gamma}(\mathbf{k}, i\omega_n + i\epsilon_n), \quad (15)$$

\mathbf{k} 空間での和を次式で計算する。

$$N_L^{-1} \sum_{\mathbf{k}} E(W(\mathbf{k})) = \int_0^{w_d} dw E(w) R(w). \quad (16)$$

但し、 $R(w) \equiv N_L^{-1} \sum_{\mathbf{k}} \delta(w - W(\mathbf{k}))$ 、 d を系の次元として、 $w_d \equiv (2t_{dp})^2 d$ である。 $T = 0$ で化学ポテンシャルが $E_-(\mathbf{k})$ 内にあるように、粒子数密度を $n = N_L^{-1} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \theta(-E_-(\mathbf{k})) \equiv \sum_{\mu=d,p} n_\mu$ とする。このとき、系の特徴的なエネルギーは $\omega_- \equiv E_+(\mathbf{k}_F) = \epsilon_d + \epsilon_p$ と $\omega_+ \equiv E_+^{\text{top}} - E_-^{\text{bot}} = [\Delta^2 + 4w_d]^{1/2}$ 間にあり、バンド幅は $W_B = (\omega_+ - \Delta)/2$ と書ける。

さて、 $d = 2$ では $t(\mathbf{k}) = 2t_{dp}a[(k_x^2 + k_y^2)/2\pi]^{1/2}$ 、 $d = 1$ では $t(\mathbf{k}) = 2t_{dp}[1 - ka/\pi]^{1/2}$ の模型をとる。これは $R(w) = 1/w_d$ に対応し、 $\hbar = e = a = 1$ の単位系で、(3) は $T = 0$ で次のようになる。

$$-\psi_{\dot{N}_\mu}(\omega) = \frac{1}{4W_{N_\mu}w_d} \left[\pi H(\omega) \Theta(|\omega|) - i [2(\omega_+ - \omega_-)\omega + H(\omega)F(\omega)] \right], \quad (17)$$

$$-\psi_J(\omega) = \frac{\Delta^2}{4W_Jw_2} \left[\Theta(|\omega|) - i \frac{F(\omega)}{\pi} \right]. \quad (18)$$

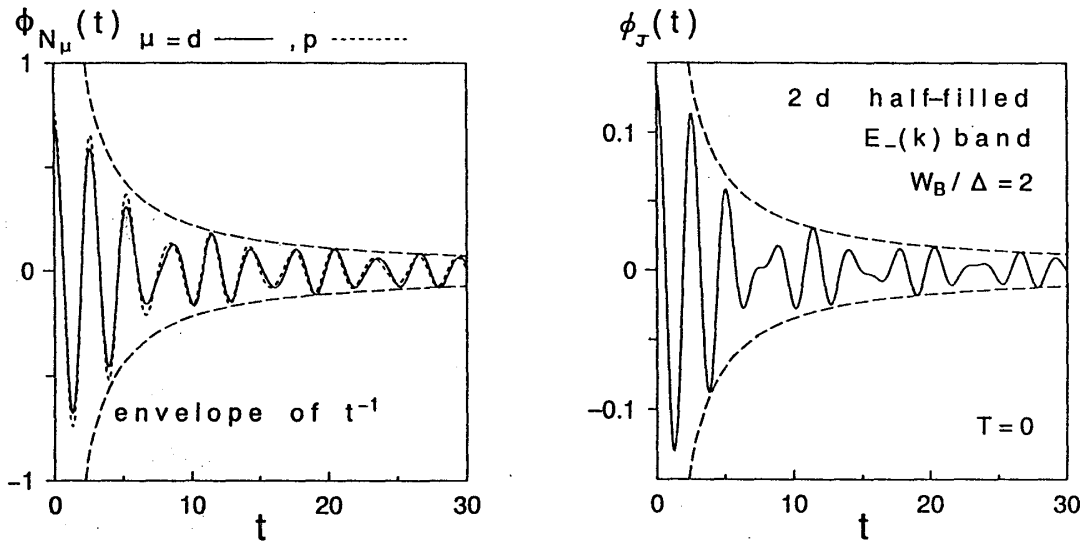
但し、 $F(\omega) \equiv \log |(\omega_+ - \omega)(\omega_- + \omega)/(\omega_+ + \omega)(\omega_- - \omega)|$ 、 $H(\omega) \equiv \omega^2 - \Delta^2$ 、そして、 $\Theta(|\omega|) \equiv \theta(|\omega| - \omega_-)\theta(\omega_+ - |\omega|)$ である。また、 $W_{N_\mu} w_d \equiv 2(\omega_- - \epsilon_\mu) + [\omega_+ - \omega_- - \Delta^2(\omega_-^{-1} - \omega_+^{-1})]/2$ 、 J については $d = 2$ で $W_J w_2 \equiv 2\epsilon_p \epsilon_d / \pi \omega_- + (\Delta^2 / 2\pi)(\omega_-^{-1} - \omega_+^{-1})$ である。これらを用いて、記憶関数は $A = N_\mu, J$ として、次式で与えられる。

$$\varphi_A(t) = \frac{2}{\pi} \int_{\omega_-}^{\omega_+} d\omega \cos \omega t \varphi'_A(\omega), \quad (19)$$

$$\varphi'_{N_\mu}(\omega) = \frac{4\pi W_{N_\mu} w_d H(\omega)}{[P_{N_\mu}(\omega)]^2 + [\pi \omega^{-1} H(\omega)]^2} \Theta(|\omega|), \quad (20)$$

$$\varphi'_J(\omega) = \Delta^2 \frac{4W_J w_2 \omega^2}{[4w_2 P_J(\omega)]^2 + \Delta^4} \Theta(|\omega|). \quad (21)$$

ここで、 $P_{N_\mu}(\omega) \equiv \omega^{-1} H(\omega) F(\omega) + 2(\omega_+ - \omega_-) - 4W_{N_\mu} w_d$ 、 $4w_2 P_J(\omega) \equiv 4W_J w_2 \omega - (\Delta^2 / \pi) F(\omega)$ である。 $d = 2$ 、 $n = 1$ 、 $2t_{dp} = 1$ そして、 $W_B / \Delta = 2$ での、(19) の数値計算を次に示す。このとき、 $\Delta = 0.577$ から $n_d = 0.616$ 、 $n_p = 0.384$ である。特徴的時間は $t_0 \equiv \omega_+^{-1} = 0.346$ で、 $t \lesssim t_0$ では $\varphi_A(t) - \varphi_A(0^+) \propto -t^2$ 、 $t \gg t_0$ では波束の包絡線が t^{-1} を示している。また、(12) や (13) のバンド間遷移は外場による励起ではなく、自発的は遷移をあらわしている。このことは (20) や (21) の $\Theta(|\omega|)$ によっても理解できる。したがって、これらの揺らぎが白色の Langevin force とは異なり、記憶関数が時間のべきで特徴付けられる、自発的に強く色づいた揺らぎである、と結論できる。



t^{-1} の包絡線を持った、揺らぎの記憶関数

[3] force-force correlation function による揺らぎ

これまでの森公式による多くの研究は、(2) の分子、つまり、force-force correlation function (FFCF) である (3) を用いていた。(2) からわかるように、FFCF は高振動数極限では有効な近似解である。しかしながら、有限振動数についての有効性は吟味されずにいた。そこで、 $n = 1$ ではあるが、FFCF を調べてみると、 $\Delta \ll W_B$ では、(21) のみが (18) で評価でき、 $\Delta \gg W_B$ では (20) の $\mu = d$ のみが (17) で評価できる。したがって、同一のパラメータ領域、振動数領域であっても、FFCF の有効性は注目する演算子に依存することがわかる。FFCF の有効性の成立条件を現在調べている。

参考文献

- 1) H. Mori: Prog. Thor. Phys. **33** (1965) 423
- 2) J. Okada, I. Sawada and Y. Kuroda: J. Phys. Soc. Jpn. **64** (1995) 4092
- 3) I. Sawada: J. Phys. Soc. Jpn. **65** (1996) 342
- 4) I. Sawada, J. Okada and Y. Kuroda: J. Phys. Soc. Jpn. **65** (1996) 525
- 5) I. Sawada: J. Phys. Soc. Jpn. **65** (1996) 3100
- 6) I. Sawada: J. Phys. Soc. Jpn. **66** (1997) 2218